第 4 章 量子力学概述

4.1 Copenhagen 诠释

下面以一维问题为例，我们逐条比较经典力学（主要是 Hamilton 形式）和量子力学（Copenhagen 诠释）的理论框架。

定义 4.1 (运动状态描述)

在经典力学的 Hamilton 形式中，质点的运动状态用相空间中的一个点 $(x(t), p(t))$ 描述。量子力学中粒子的运动状态由 Hilbert 空间中的一个矢量 $|\psi(t)\rangle$ 描述。 ♣

注意波函数有两种归一化形式。对于有限维空间，归一化为 $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$。对于无限维空间, 波函数的归一化为 δ 函数，例如前面学过的 $\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$。

定义 4.2 (力学量)

在经典力学的 Hamilton 形式中，所有的力学量均为坐标 x 和动量 p 的函数，统一记为 $\omega = \omega(x, p)$，常见的力学量包括动能、势能和角动量。量子力学中由于坐标和动量被升级成算符 $x \to \widehat{X}, p \to \widehat{P}$, 所有的力学量 ω 也被升级成算符 $\widehat{\Omega} = \omega(x \to \widehat{X}, p \to \widehat{P})$。 ♣

从经典力学的力学量写出量子力学中的对应算符有时候比较直接，比如动能

$$\frac{p^2}{2m} \to \frac{\widehat{P}^2}{2m}.$$

但对于算符比如 xp，在经典力学中有 $xp = px$，那么在量子力学中应该写成 $\widehat{X}\widehat{P}$ 还是 $\widehat{P}\widehat{X}$ 呢？考虑到经典力学中 $xp \in \mathbb{R}$，我们希望量子力学中对应的算符也能有实数的本征值，因此我们倾向于构建厄米算符，

$$xp \to \frac{1}{2}\left(\widehat{X}\widehat{P} + \widehat{P}\widehat{X}\right).$$

更复杂的经典力学量可能有多于一个可能的厄米算符，比如 x^2p 对应的如下两个算符都是厄米的

$$\frac{1}{2}\left(\widehat{X}^2\widehat{P} + \widehat{P}\widehat{X}^2\right), \qquad \widehat{X}\widehat{P}\widehat{X}.$$

这两个算符的任意线性组合也是厄米算符。此时量子力学中对应的力学量需要由实验来确定。在本讲义中，除非特别说明，我们都默认力学量算符是厄米算符。

定义 4.3 (测量)

经典力学中的观测不会改变质点的运动状态。在量子力学中，设力学量 $\widehat{\Omega}$ 有本征值 $\omega_i (i = 1 \ldots n)$ 没有简并，对应的归一化本征态为 $|\omega_i\rangle$。若粒子处于态 $|\psi\rangle$ 上，对力学量 $\widehat{\Omega}$ 的测量结果只可能是 $\widehat{\Omega}$ 的某个本征值，并且得到本征值 ω_i 的概率正比于 $|\langle\omega_i|\psi\rangle|^2$。测量后粒子的状态从 $|\psi\rangle$"瞬时" 坍缩到 $|\omega_i\rangle$. ♣

在没有简并的情况下，测量 $\widehat{\Omega}$ 得到本征值 ω_i 的概率，

$$P(\omega_i) = c|\langle\omega_i|\psi\rangle|^2,$$

其中 c 为待定常数。因为测量值只能是 $\widehat{\Omega}$ 的本征值，不能是其他的数，那么 $\sum_i P(\omega_i) = 1$，将上面的表达式带

入可得，

$$1 = c\sum_i \langle\psi|\omega_i\rangle\langle\omega_i|\psi\rangle = c\langle\psi|\left(\sum_i |\omega_i\rangle\langle\omega_i|\right)|\psi\rangle = c\langle\psi|\psi\rangle.$$

所以测量到 ω_i 的概率为，

$$P(\omega_i) = \frac{|\langle\omega_i|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle}. \tag{4.1}$$

在没有简并的情况下，对于任意态矢量 ψ，我们可以将其用 $\widehat{\Omega}$ 的归一化本征态 $|\omega_i\rangle$ 展开，

$$|\psi\rangle = \sum_i |\omega_i\rangle\langle\omega_i|\psi\rangle.$$

所以测量得到 ω_i 的概率等于 $|\psi\rangle$ 在 $|\omega_i\rangle$ 上的投影（坐标分量）的模平方除以 $|\psi\rangle$ 长度的平方。

若有与 $|\psi\rangle$ 平行的矢量 $|\psi'\rangle = a|\psi\rangle, (\forall a \neq 0 \in \mathbb{C})$，由公式(4.1)可知 $|\psi\rangle$ 和 $|\psi'\rangle$ 对所有力学量的测量，得到的测量值、相应的概率和测后的态都是相同的，这说明这两个矢量描述同样的物理状态。由此我们得到一个重要的结论，描述粒子运动状态的矢量 $|\psi\rangle$ 的长度是无关紧要的。既然这样，我们就可以使用归一化的态矢量 $|\psi\rangle$，这样我们就可以略去公式(4.1)的分母。在实际计算中，这里的归一化是最常犯的错误之一，本章我们先保留这个归一化因子，当大家对相应的计算熟悉后，我们就可以直接用归一化的 $|\psi\rangle$ 了。

思考：$\langle\psi|\psi\rangle$ 是否可以唯一地确定归一化的态矢量？

✍ **练习 4.1** 设粒子在某时刻的态矢量为 $|\psi\rangle$，下面在该时刻测量粒子的位置。即取力学量 $\widehat{\Omega} = \widehat{X}$，其本征值为 x，对应的归一化本征态为 $|x\rangle$。计算可能得到的测量值、相应的概率和测量后粒子的状态。

✍ **练习 4.2** 若粒子与力学量 $\widehat{\Omega}$ 的本征态平行: $|\psi\rangle = c|\omega_i\rangle$，其中 $c \neq 0 \in \mathbb{C}$, 则对该粒子测量 $\widehat{\Omega}$ 可能得到哪些测量值，相应的概率是多少，测量后的状态是什么？

✍ **练习 4.3** 若力学量 $\widehat{\Omega}$ 有 n 个归一化的本征态 $|\omega_i\rangle, (i = 1 \dots n)$，某粒子的态矢量为,

$$|\psi\rangle = |\omega_1\rangle + 2|\omega_2\rangle + 3|\omega_3\rangle,$$

其中 ω_1、ω_2、ω_3 互不相同，求对该粒子测量 $\widehat{\Omega}$ 可能得到的测量值、相应的概率和测量后粒子的状态。

思考：为什么对量子系统的观测会导致系统波函数的坍缩，而对经典系统的测量却不会对系统有影响？

✍ **练习 4.4** 若力学量 $\widehat{\Omega}$ 的本征态 $|\omega_i\rangle$ 无简并，对某粒子测量 $\widehat{\Omega}$ 得到 ω_2，求测量后该粒子的状态。

思考：在练习 4.4 中，如果 $\widehat{\Omega}$ 的本征值 ω 的简并度为 2，对某粒子测量 $\widehat{\Omega}$ 得到 ω，能否确定地知道测量后粒子的状态？

4.2 测量和不确定原理

4.3 薛定谔方程

4.4 概率守恒方程